

【氏名】 金子 敏宏

【現職】 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 特任研究員

【専門分野】 熱工学 / 物理化学 / 計算工学

研究費取得3件(全て代表者), 学術論文25件(うち筆頭著者9件)

2019年度卓越研究員候補者



2007.04～2013.03：慶應義塾大学

- ・ 2012年3月博士(工学)取得.
- ・ 分子動力学シミュレーションにおいて, 固液平衡状態を計算するための新規計算手法開発.

2013.04～2018.04：東京理科大学

- ・ 大学助教の仕事(熱力学演習, 風洞実験(流体力学), その他雑務)を担当.
- ・ 多孔質体内部の流体の凝固点予測モデルの構築.
- ・ ナノ細孔内部における新規物質状態の探索.

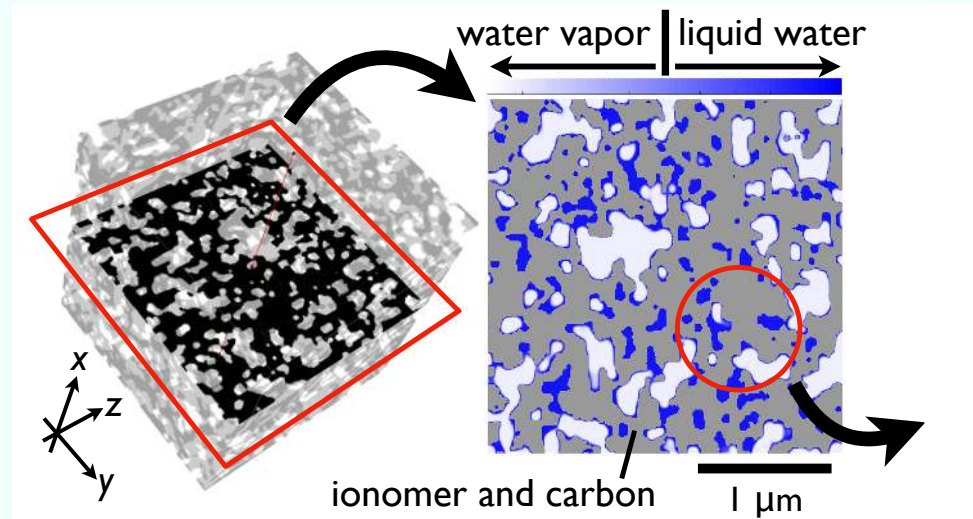
2018.04～2020.03：東京大学

- ・ 固体高分子型燃料電池カソード触媒層における液水生成・酸素拡散の連成解析.

2020.04～現在[任期2021年度まで]：現職

- ・ 水処理膜製造プロセスの最適化に向けた高分子溶液の相溶性予測.
- ・ 回路基板高分子材料の誘電物性評価および企業研究所への技術移転.

固体高分子型燃料電池触媒層内部の液水分布

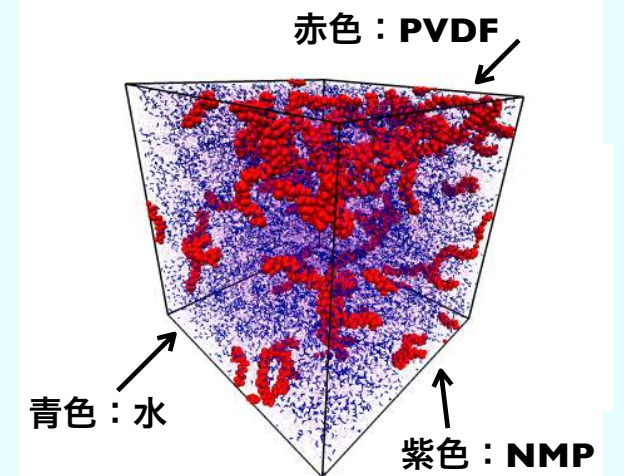


Int. J. Heat Mass Transf. 2020

数値解析を駆使した メカニズム解明と現象予測

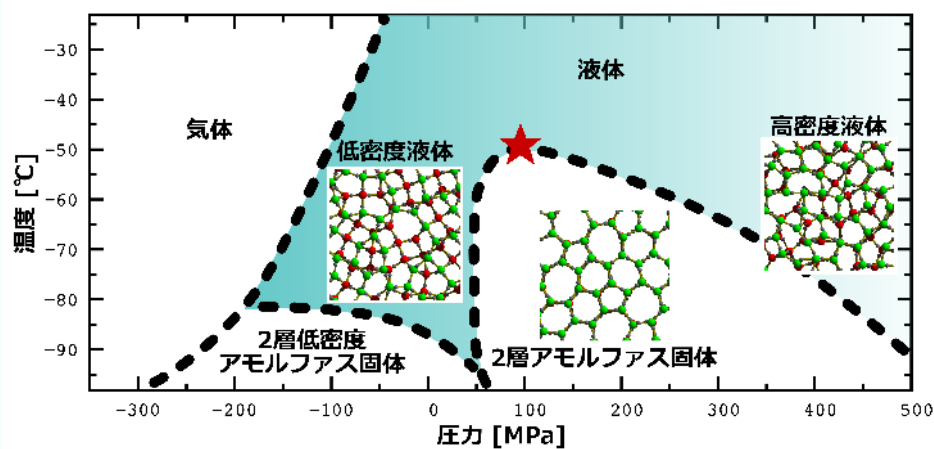


高分子溶液の相溶性予測



【得意分野】
分子動力学シミュレーション/
計算手法の選定/原理的なところから
の手法改良/解析コード開発

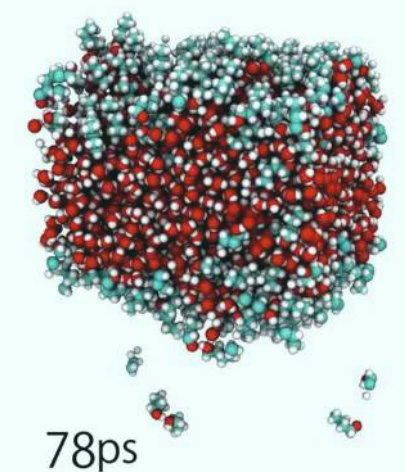
新しい液体状態の探索



PNAS 2017, PNAS 2018

回路基板高分子材料の 誘電物性評価

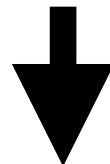
アルコール水溶液の 表面張力計算



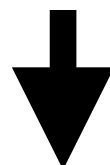
研究成果(博士論文)

分子動力学シミュレーション

初期条件 $[r^N(0), v^N(0)]$ の準備



(温度 T , 圧力 P , 境界条件の指定)



$[r^N(t), v^N(t)]$ の取得と解析

【問題点】

低温下では初期条件によって正しい時系列 $[r^N(t), v^N(t)]$ を取得できないことがある。

【解決策】

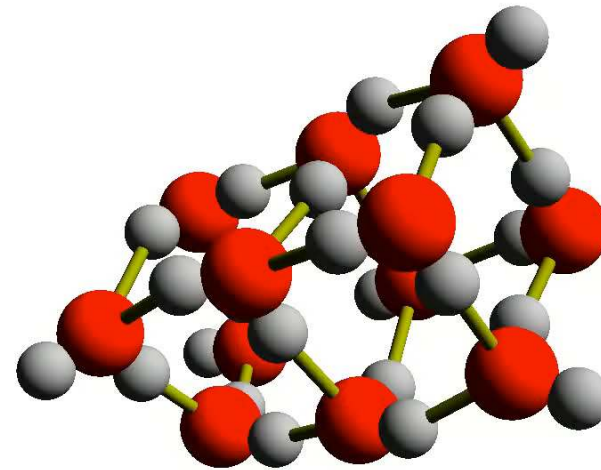
熱・統計力学をベースにした
熱揺らぎや圧力揺らぎの扱いの
見直しと支配方程式の定式化。

-> 水分子集合体の比熱計算とサイズ依存性

T. Kaneko, T. Akimoto, K. Yasuoka, A. Mitsutake and

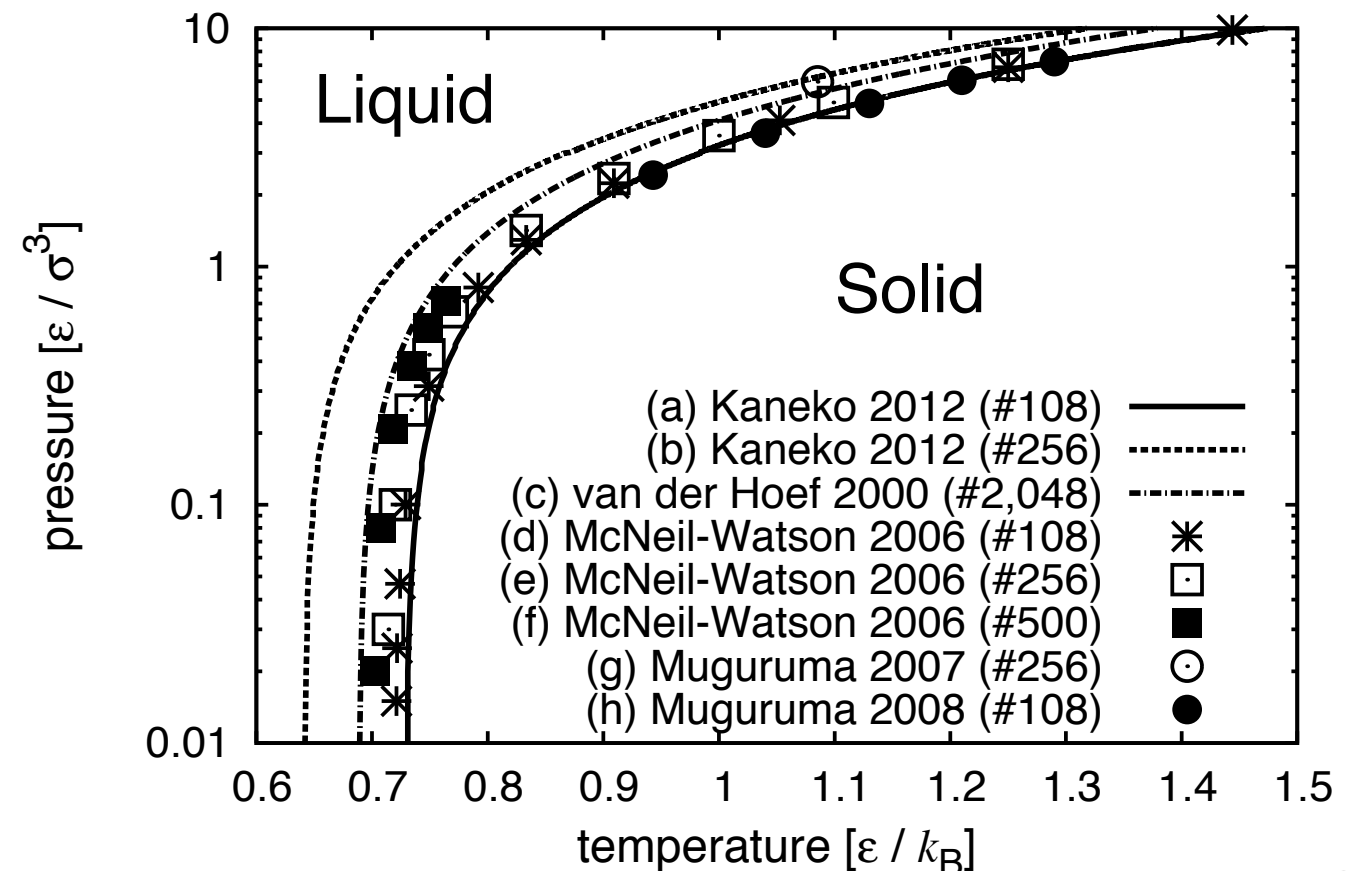
25.01 ns

X. C. Zeng, *J. Chem. Theory Comput.*, 2011



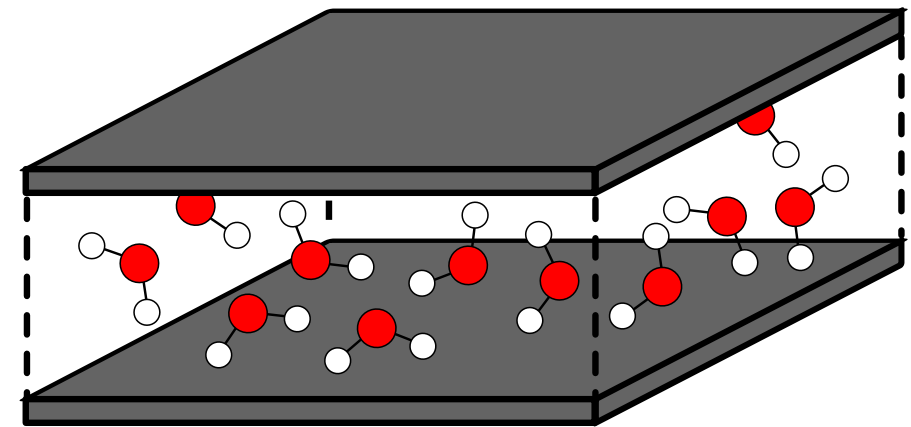
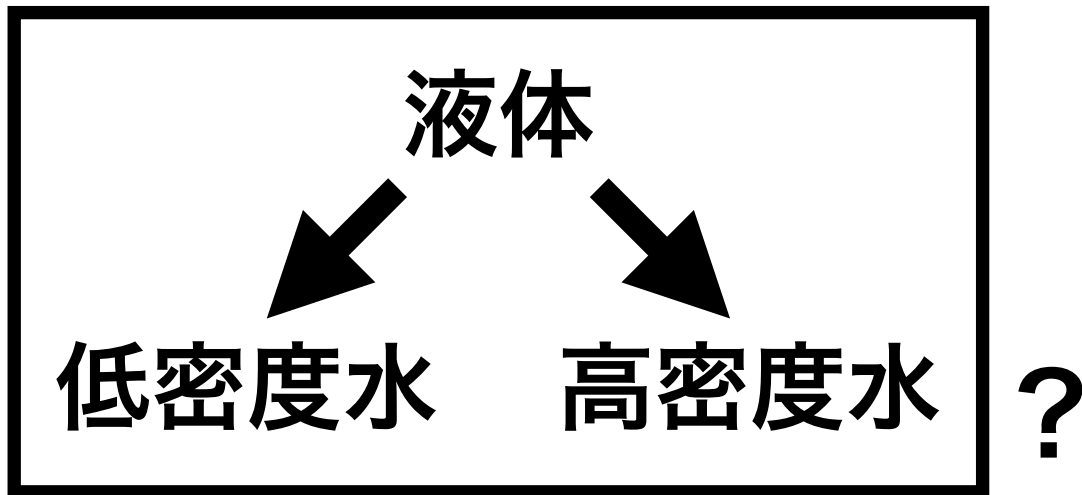
-> 単原子分子液体の固液平衡条件の決定

T. Kaneko, A. Mitsutake and K. Yasuoka, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2012

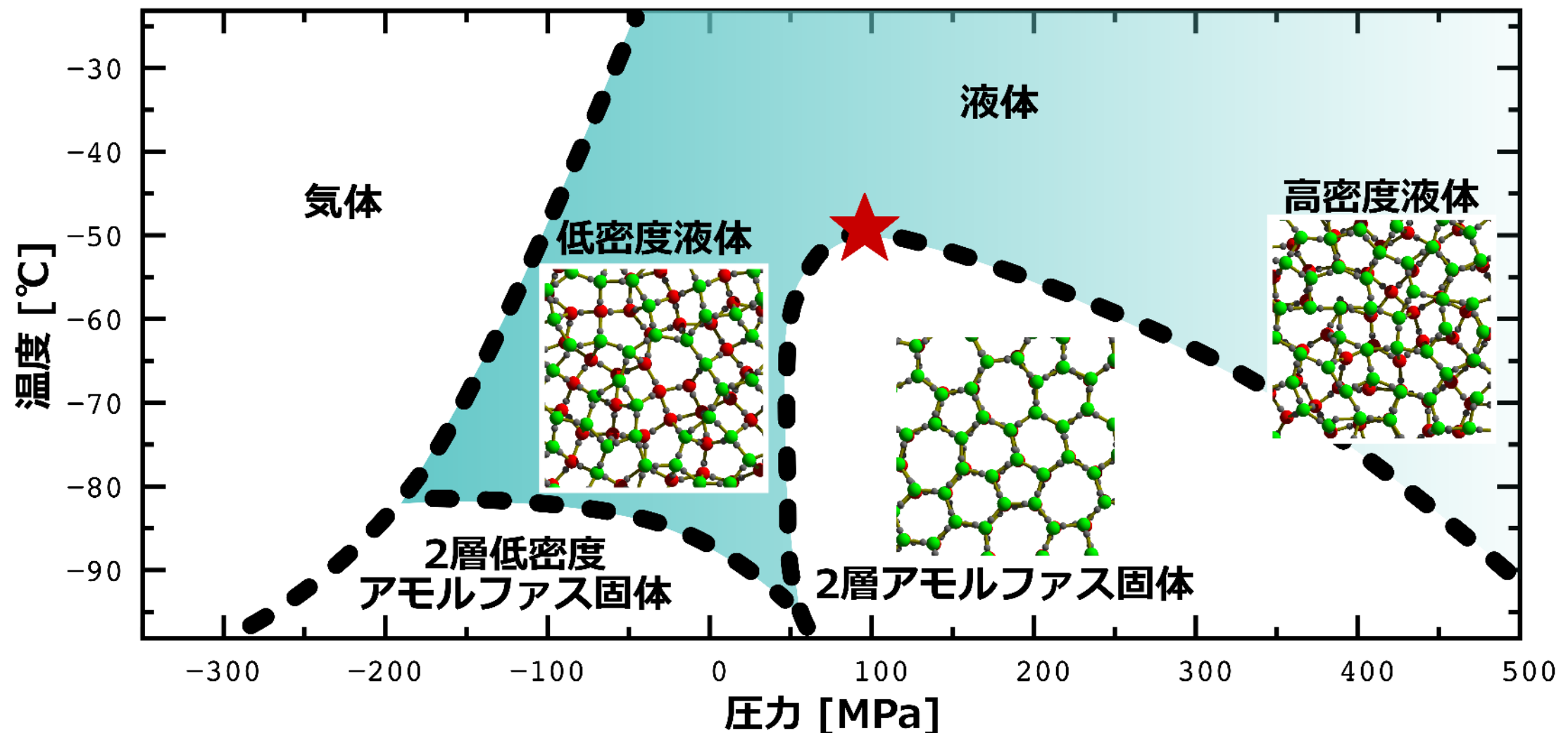


研究成果：ナノ細孔内部における新規物質状態の探索

T. Kaneko, J. Bai, T. Akimoto, J. S. Francisco, K. Yasuoka, and X. C. Zeng, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2018



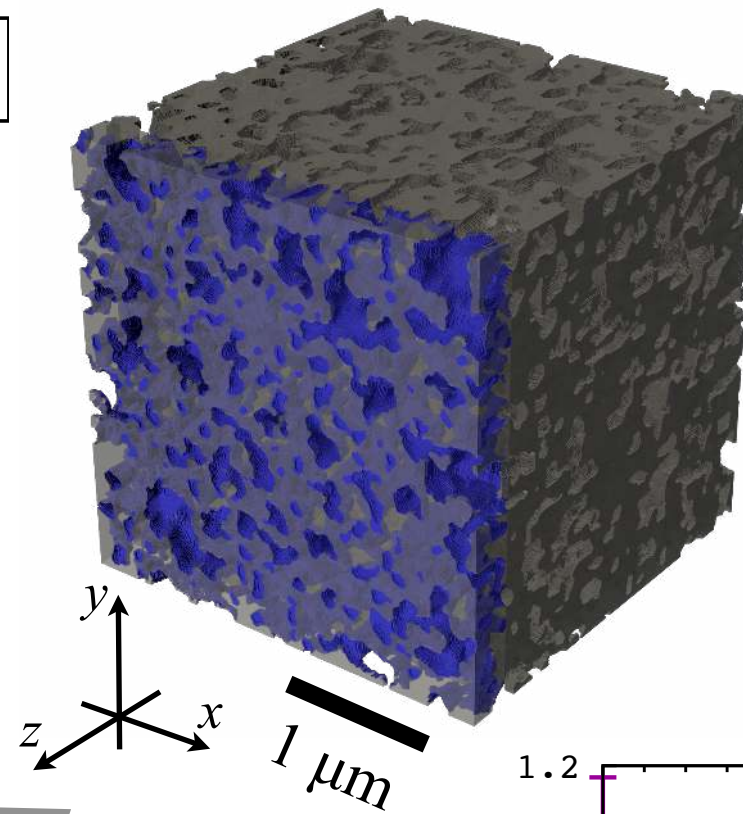
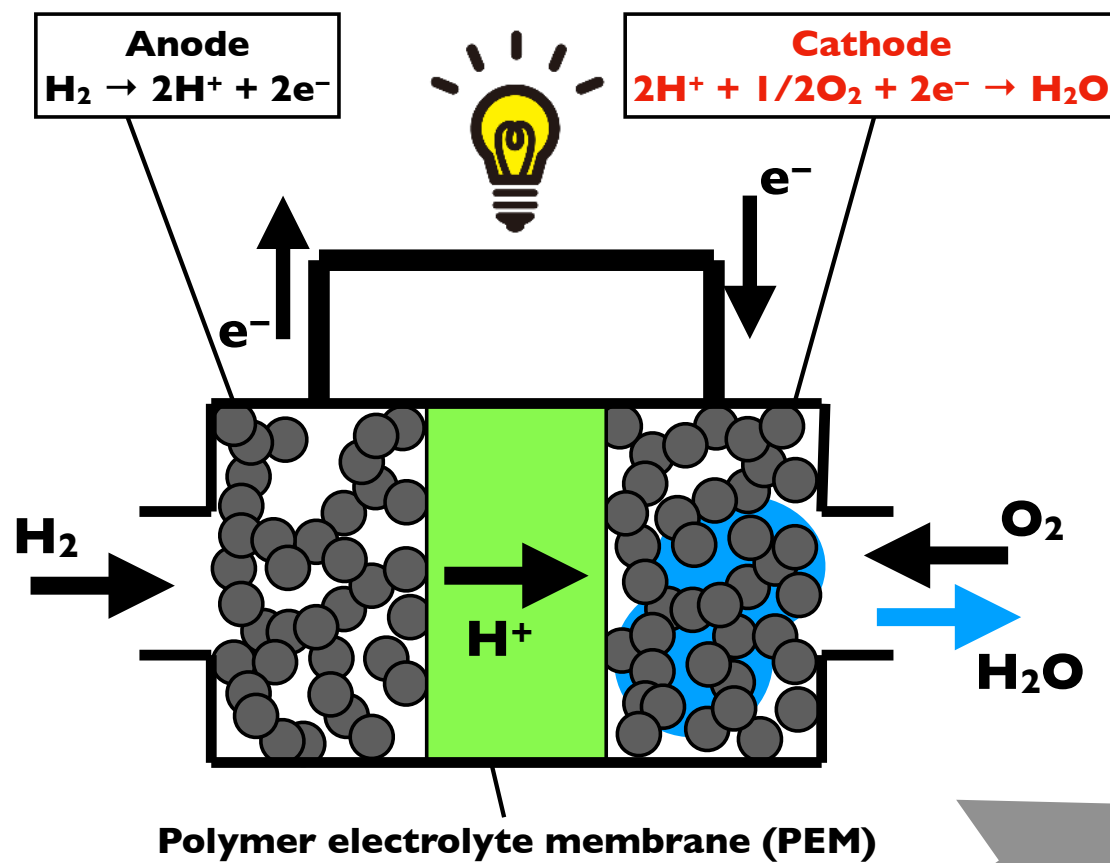
-> 通常の液体, 超臨界水とも異なる新しい水の状態がナノ細孔中に安定に存在できることを発見.



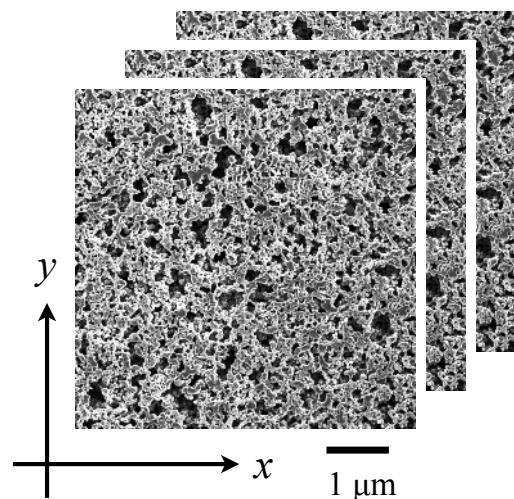
研究成果：固体高分子型燃料電池カソード触媒層における

液水生成・酸素拡散の連成解析

T. Kaneko, Y. Yoshimoto, T. Hori, S. Takagi, J. Ooyama, T. Terao, and I. Kinefuchi, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 2020

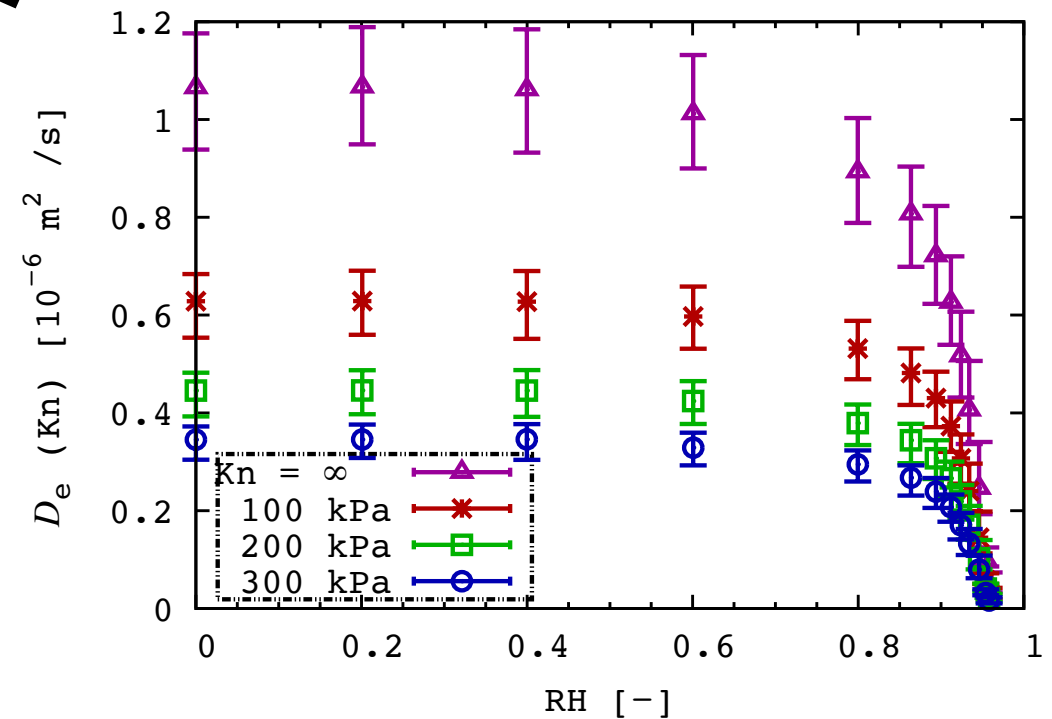


液水生成・酸素拡散
の連成解析



3次元構造構築

触媒層実構造連続断面画像
(cryo FIB-SEM)



研究成果：水処理膜製造プロセスの最適化に向けた

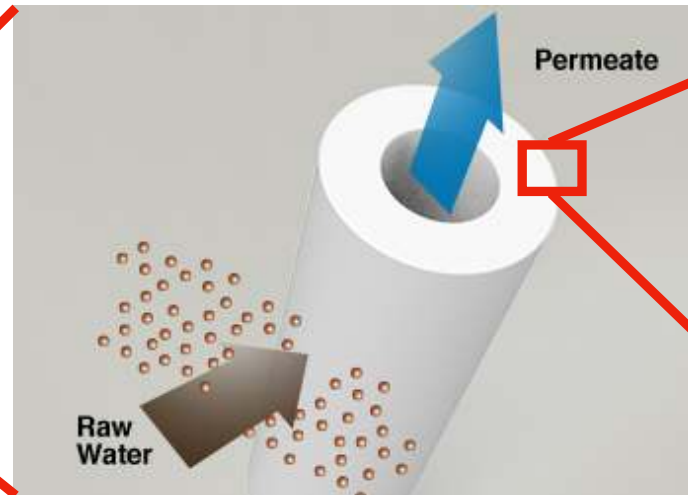
高分子溶液の相溶性予測

金子敏宏(東大新領域), 北畑雅弘(東レ), 岡崎進(東大新領域), 分子シミュレーション討論会, 2020.

水処理用の膜モジュール(東レ)



https://www.toraywater.com/jp/mf/mf_001.html

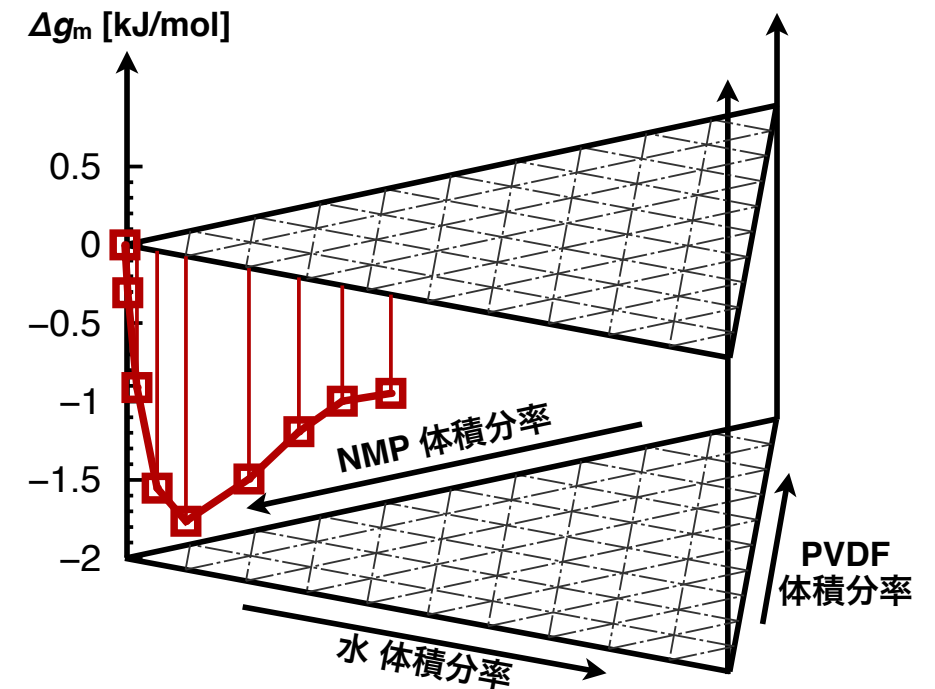
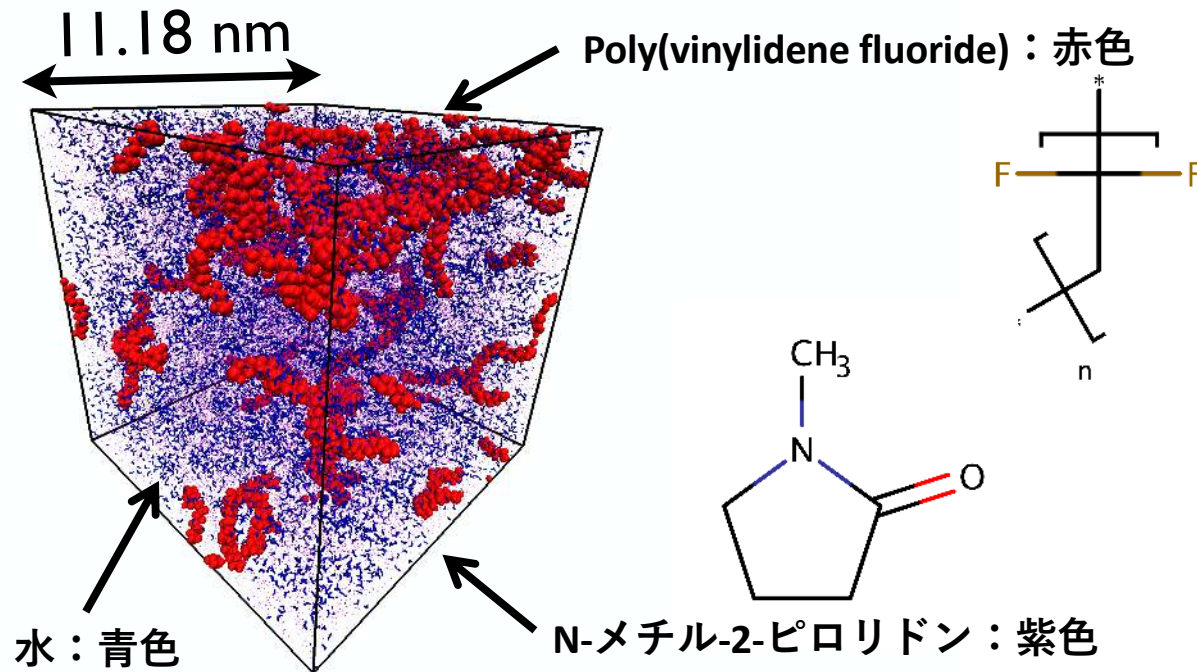


膜表面断面図

細孔サイズ ~ 10 nm

inside

H. Strathmann et al. *Desalination*, **16**, 179 (1975).



3成分混合系の全原子分子動力学シミュレーション

混合自由エネルギー計算と相図の提案

計算関係スキル一覧

得意言語

Fortran, shell 全般

使用可能言語

c++, python

使用可能ソフト

**Gromacs(分子動力学), OpenFOAM(流体関係),
paraview(可視化), VMD(可視化), TensorFlow(機械学習)**

その他

**並列計算(OpenMP, OpenMPI)コード開発, スパコン利用経験
(Oakforest-PACS, Reedbush, さくら高火力スパコン),
計算環境構築経験など.**